

# Einführung in die Künstliche Intelligenz und ihre Bedeutung in der pharmazeutischen Praxis

Dr. Laura Isigkeit  
isigkeit@em.uni-frankfurt.de

Institut  
Pharmakologie und  
Klinische Pharmazie

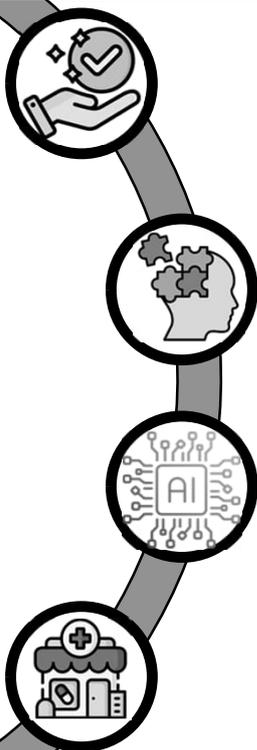
## Über mich



- 2015 – 2020 • Bachelor & Master Bioinformatik, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
- 2020 – 2024 • Promotion, Goethe Universität Frankfurt „Datenbasierte Identifizierung und Generierung von Modulatoren nukleärer Rezeptoren“
- 2023 – 2024 • Weiterbildung „Data Science in Health“, Goethe Business School Frankfurt University
- Seit 2025 • Postdoktorand, Georg-Speyer-Haus & Goethe Universität Frankfurt in AG Oppermann

Es besteht kein Interessenkonflikt

GLIEDERUNG



Aktuelle Bestandsaufnahme

Was ist Intelligenz?

Methoden der künstlichen Intelligenz

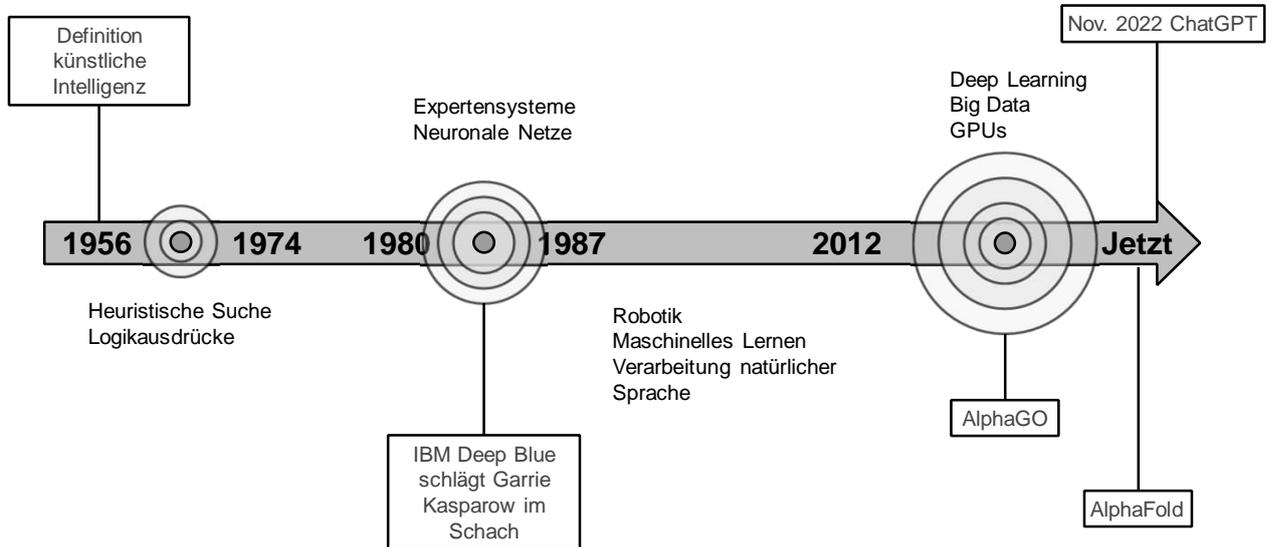
Anwendungen im Bereich Medizin/Pharmazie/Apotheke

GLIEDERUNG



**Aktuelle Bestandsaufnahme**

# Geschichte der KI



Pharmaindustrie

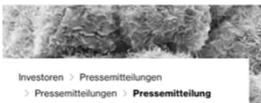
## Merck vereinbart KI-Partnerschaften für Wirkstoffforschung

Mit Künstlicher Intelligenz will der Konzern Geschwindigkeit und Erfolgswahrscheinlichkeit der Entwicklung steigern. Die beiden Merck-Partner erhalten Vorauszahlungen.

20.09.2023

≈ 300  
KI-Vorhersagemodelle für die Eigenschaften von Substanzen hat Merck bereits entwickelt.[8]

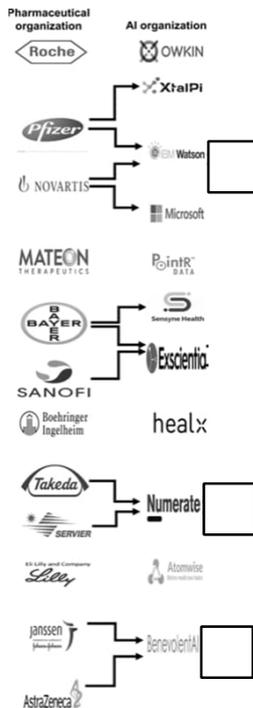
BIONTECH



## Pressemitteilung

BioNTech schließt Übernahme von InstaDeep ab

31. July 2023



healthcare-in-europe.com



Bildquelle: Bayer AG

News • Künstliche Intelligenz in der Radiologie

## Bayer akquiriert KI-Spezialisten Blackford Analysis

sanofi

Willkommen bei Sanofi in Deutschland

**SANOFI GESUNDHEITSTREND**

Was wird die Forschung nach Arzneimitteln in den nächsten 2 - 5 Jahren beschleunigen?

- 79%** Das Teilen von Forschungskennnissen, um den Wissenstransfer zu steigern
- 76%** Der Einsatz computergeschätzter Methoden bei der Suche nach Wirkstoffen
- 72%** Der Einsatz Künstlicher Intelligenz in der Auswertung von Forschungsdaten

GLIEDERUNG

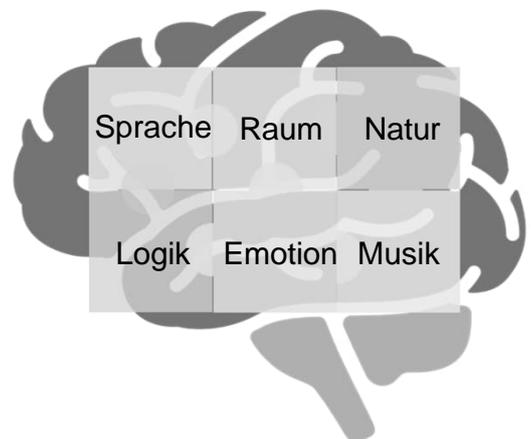


## Was ist Intelligenz?

7

## Was ist Intelligenz?

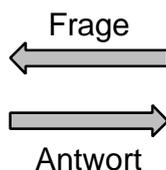
- Die Welt mit allen Sinnen so erfassen und mit ihr interagieren wie ein Mensch
- Daraus ein mindestens gleich gutes Verständnis der Welt durch selbstständiges Lernen ableiten
- Intelligenzformen in der Kognitionsforschung
  - Sprachliche
  - Logisch-mathematische
  - Naturalistische
  - Musikalische
  - Räumliche
  - Emotionale
- IQ-Test zur Messung der Intelligenz



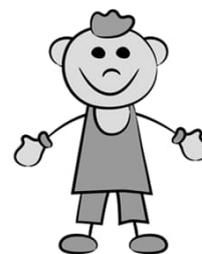
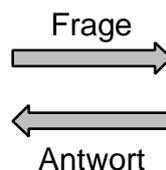
Ist eine Maschine schon so intelligent wie ein Mensch?



Prüfling 1



Fragensteller



Prüfling 2

Ist eine Maschine schon so intelligent wie ein Mensch?



Prüfling 1



Fragensteller



Prüfling 2

Beispiel

F: What music do you like?

P: I like Eminem – because he doesn't have a thing to do with "polite correctness".

F: OMG i love eminem, he's my favourite artist!

P: I wonder what Eminem's nick mean. I associate it only with a word "enema". But he is a cool guy, I like his The Real Slim Shady.

F: I know what his nickname means, his real name is Marshall Mathers. From the initials M&M phynetically sounding like Eminem.

P: Eminem is a famous crapper. No, raper... ripper... Yeah, I mean – rapper. I like his Stan and The Real Slim Shady.

...

Ist eine Maschine schon so intelligent wie ein Mensch?

Elemente bewusster Intelligenz müssen einen realen semantischen Gehalt, also Bedeutung, haben.

→ Ein wirklich intelligentes System braucht Weltverständnis!



ChatGPT:

In dieser Situation sitzen zwei Frauen am Strand und tauschen Gedanken über das Leben aus. Die erste Frau teilt mit, dass ihr Alter für sie zunehmend an Bedeutung verliert. Die andere Frau stimmt zu und sagt, dass es ihr genauso geht. Beide scheinen zu reflektieren, dass das Alter in ihren Überlegungen und Philosophien über das Leben eine geringere Rolle spielt. Dies könnte darauf hinweisen, dass sie sich mehr auf andere Aspekte des Lebens konzentrieren und sich weniger von ihrem Alter definieren lassen.

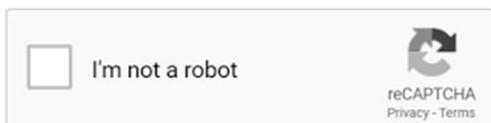
10. März 2025

11

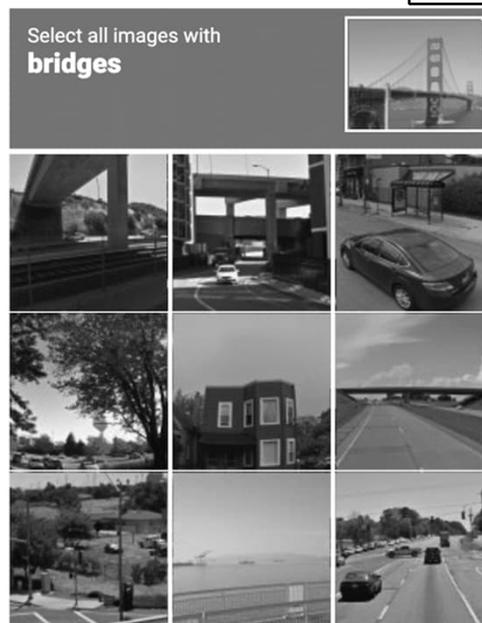
Ist eine Maschine schon so intelligent wie ein Mensch?

CAPTCHAs

Please check the box below to proceed.



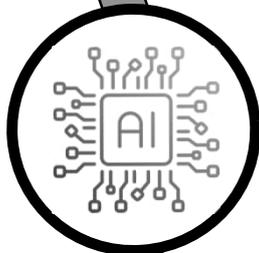
CAPTCHAs = „**C**ompletely **A**utomated **P**ublic **T**uring test to tell **C**omputers and **H**umans **A**part“



10. März 2025

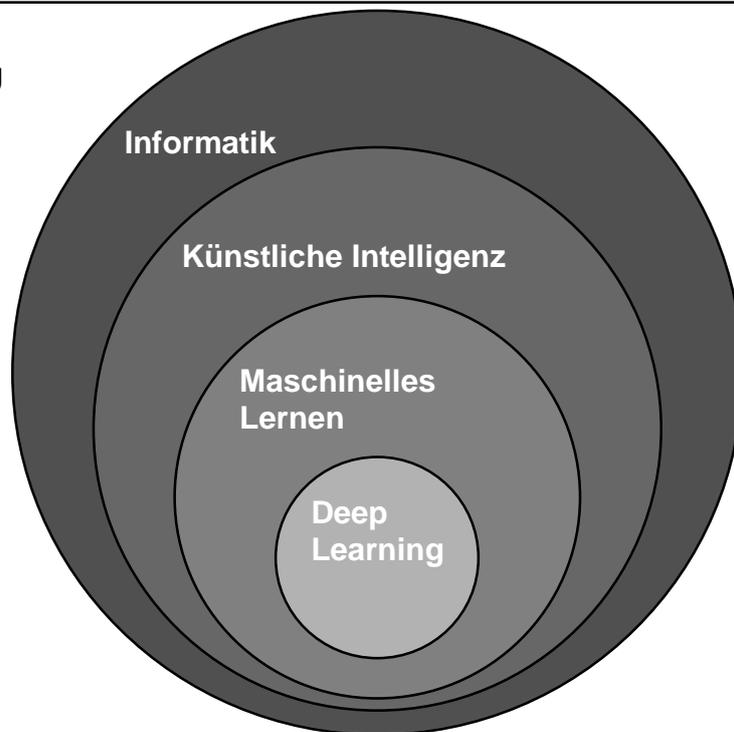
12

**GLIEDERUNG**



# Methoden der künstlichen Intelligenz

Begriffsklärung



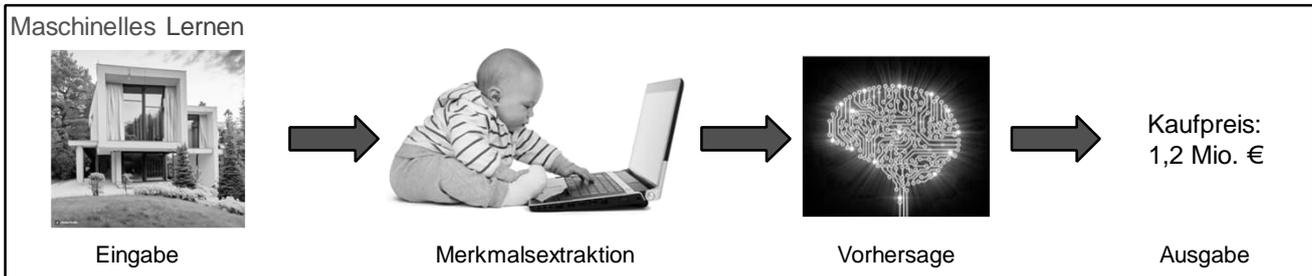
### Begriffsklärung – Maschinelles Lernen



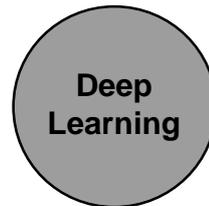
- Features werden extrahiert
- Features werden dem Algorithmus übergeben
- Algorithmus klassifiziert Beispiel

- Baujahr: 2014
- Lage: Kronberg
- Größe: 210 m<sup>2</sup>
- 7 Zimmer
- Gelbe Vorhänge

Lernen anhand von Beispielen



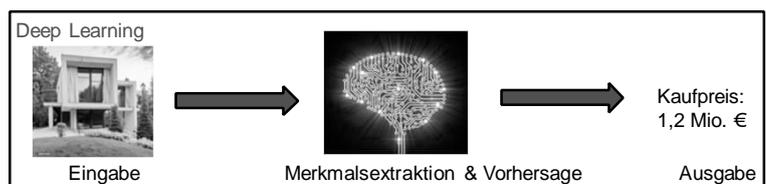
### Begriffsklärung – Maschinelles Lernen versus Deep Learning



Lernen anhand von Beispielen

- Features werden extrahiert
- Features werden dem Algorithmus übergeben
- Algorithmus klassifiziert Beispiel

- Selbständiges Lernen anhand von Rohdaten



## Begriffsklärung – Maschinelles Lernen – Methoden

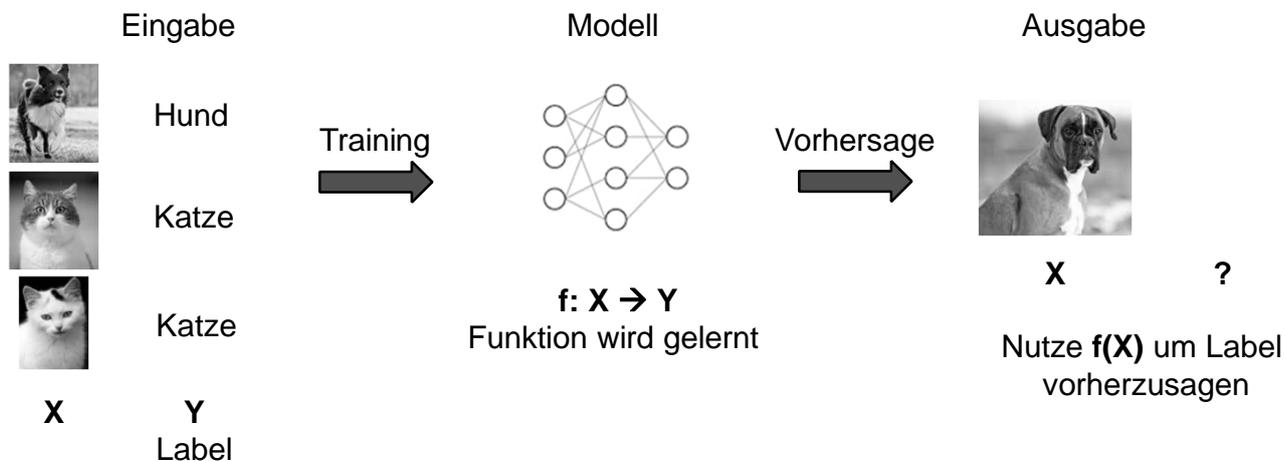

**Supervised Learning**  
 = Überwachtes Lernen

- Ermittlung von Funktionen auf Basis von Trainingsdaten, deren Zielvariable bekannt ist
- Anwendung:
  - Klassifikation
  - Regression

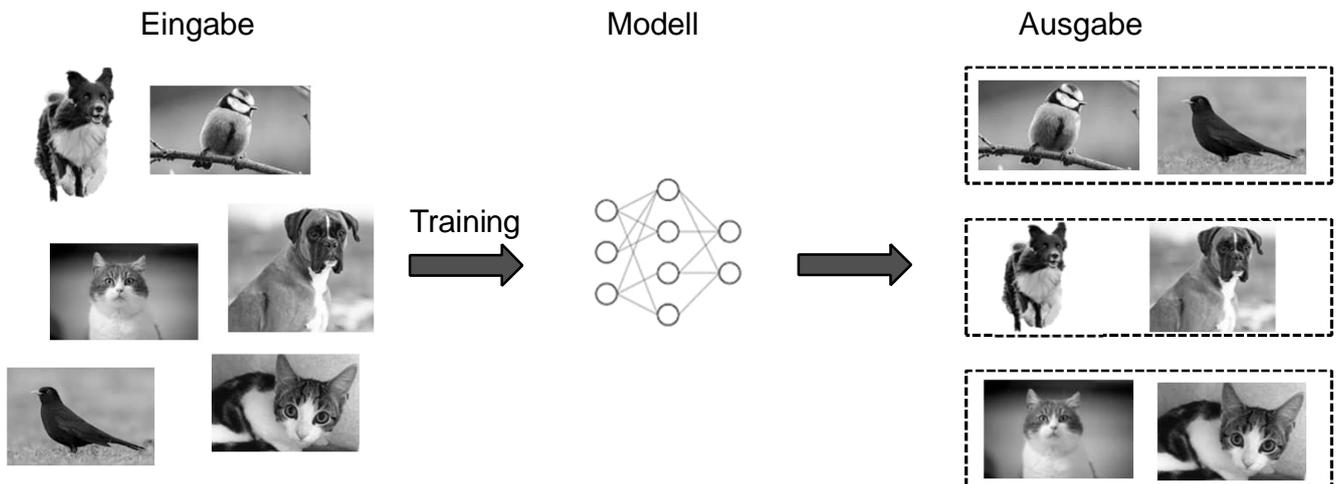
**Unsupervised Learning**  
 = Unüberwachtes Lernen

- Ermittlung unbekannter Strukturen in den Daten ohne Zielvariable
- Anwendung:
  - Clustering
  - Dimensionsreduktion

## Begriffsklärung – Maschinelles Lernen – Methoden


**Supervised Learning** = Überwachtes Lernen


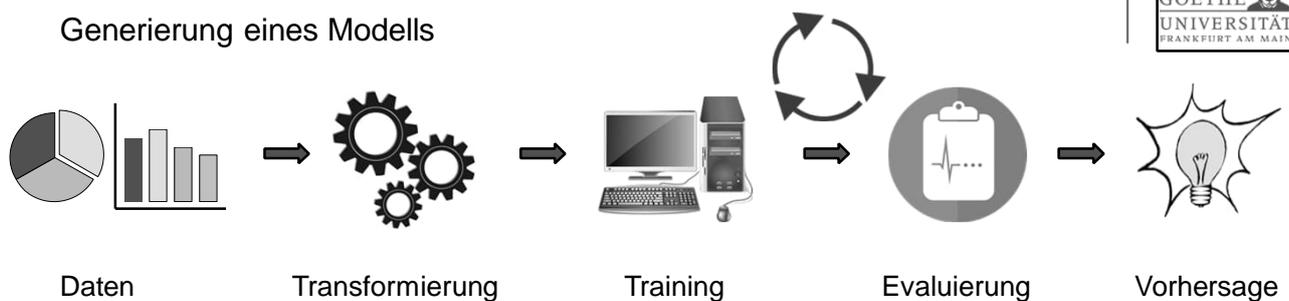
## Begriffsklärung – Maschinelles Lernen – Methoden

**Unsupervised Learning** = Unüberwachtes Lernen

10. März 2025

19

## Generierung eines Modells

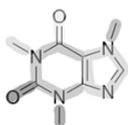


- Sammlung
- Vorbereitung
- Verarbeitung
- Filterung

- Merkmalsextraktion
- Lesbares Format

- Auswahl Modell
- Aufteilung der Daten: Training & Test
- Modell lernt Muster aus Trainingsdaten
- Generierung Modell

- Anwendung auf Testdaten
- Bewertung der Performance



Fingerprints:  
(0,0,1,0,1,1,1,1,0,0,0,1,...)

SMILES:

Cn1c(=O)c2c(ncn2C)nc1=O

10. März 2025

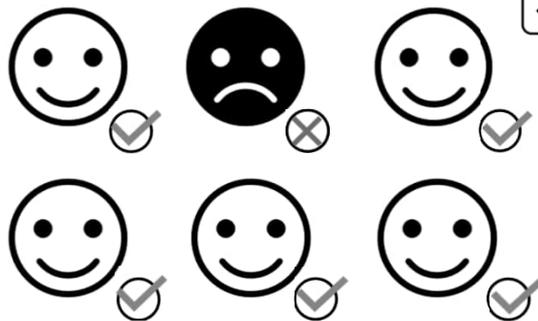
20

### Bewertung von KI-Algorithmen zur Krankheitsvorhersage

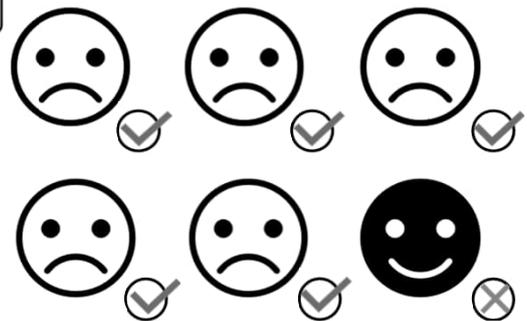
1. Klassifikationsgenauigkeit

2. Sensitivität

3. Spezifität



✓ 83 %  
✗ 17 %



Vorhersage:

Gesund

Krank

### Bewertung von KI-Algorithmen zur Krankheitsvorhersage

1. Klassifikationsgenauigkeit

2. Sensitivität

3. Spezifität

		Vorhergesagt	
Tatsächlich		True positive	False negative
		False positive	True negative

$$\text{Sensitivität} = \frac{TP}{TP+FN}$$

$$\text{Spezifität} = \frac{TN}{FP+TN}$$

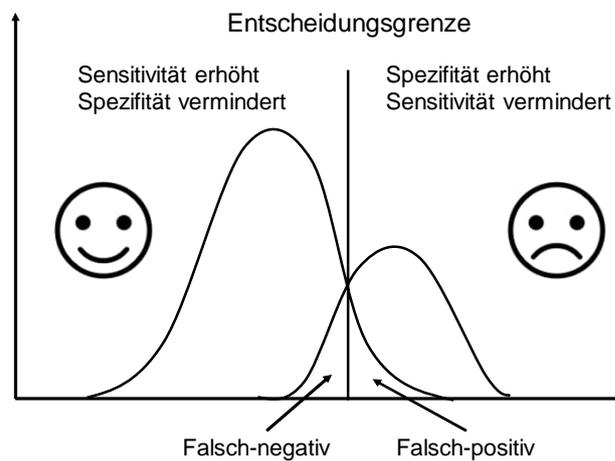
## Bewertung von KI-Algorithmen zur Krankheitsvorhersage



1. Klassifikationsgenauigkeit

2. Sensitivität

3. Spezifität



## Vorsicht Verwechslungsgefahr!

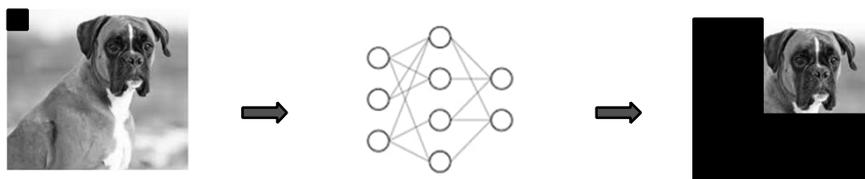


## Bewertung von KI-Algorithmen – eXplainable AI



### Modellagnostische Methoden

- Permutieren der Eingabe
- Welche Bereiche haben den größten Einfluss



## Bewertung von KI-Algorithmen – eXplainable AI



Klassifizierung als „Wolf“



Erklärung

## Bewertung von KI-Algorithmen – eXplainable AI

Klassifizierung  
„Pferd“

Erklärung

Klassifizierung  
„Nicht Pferd“

Erklärung

## Large Language Models (z. B. ChatGPT)



## Training

- Lernen aus großen Datenmengen
- Transformer-Architektur mit Attention-Layern
- Feinabstimmung mit menschl. Feedback

„Wie wirkt Paracetamol?“



## Vorhersage

- Mittels Wahrscheinlichkeiten

„Paracetamol hilft gegen ...“

- ❖ 80 % - „Schmerzen“
- ❖ 15 % - „Fieber“
- ❖ 5 % - „Kopfschmerzen“



GLIEDERUNG



## Anwendungen im Bereich Medizin/Pharmazie/Apotheke

PubMed  
Insgesamt

Erfordernisse überfordern  
menschliche Geisteskraft

1806



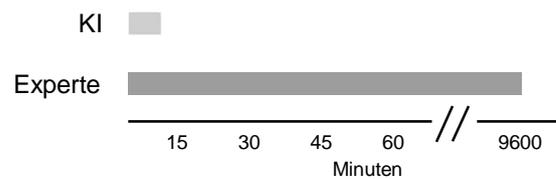
Klinikärzte verbringen 44% ihrer Zeit mit Dokumentation

## KI in der Medizin



### Medikationsplan für Gehirntumor

- Analyse des Genoms des Patienten und Vorschlag eines Medikationsplans



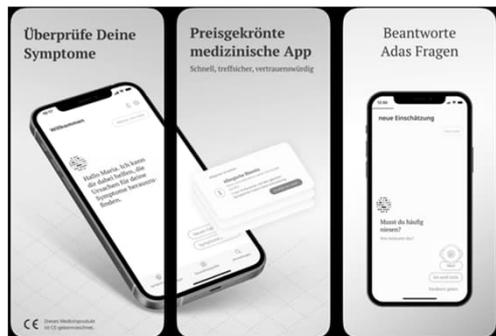
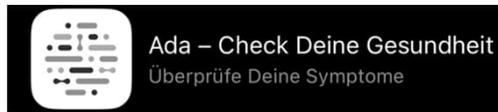
## KI in der Medizin



### ADA Health App

- 97 % sichere Beratung
- 99 % Erfassung aller Krankheitsbilder
- 70 % Treffsicherheit bei den ersten 3 Krankheitsvorschlägen
- Seltene Erkrankungen
  - 54 % Erkennung von seltenen Erkrankungen früher als klinische Diagnose
  - Beschleunigung der Diagnose um bis zu 50%
  - 33 % war korrekte Diagnose beim ersten dokumentierten Patientenbesuch vorhanden – in 16 % der beste Vorschlag

## KI in der Medizin



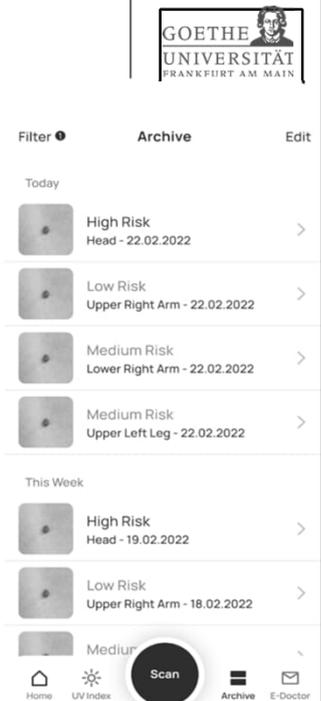
10. März 2025

33

## KI in der pharmazeutischen Betreuung

### Hautkrebs

- Klassifizierung von klinischen Bildern Studie über 2,5 Jahre
  - Performance im Vergleich gegen 21 zertifizierte Dermatologen
  - 100% Melanomfälle erkannt
  - 99,5% aller Hautkrebsvarianten erkannt
  - 92,5 % der präkanzerösen Läsionen (Vorstufen) erkannt
- SkinScreener – Medizinprodukt der Klasse IIa



10. März 2025

34

## KI in der Pharmazie



### Apotheke

#### Waren & Preismanagement

- Analyse des Warenlagers
- Vorschläge für Artikelersetzung
- automatische Defekt- und Nachlieferungs-Analyse
- Vermeidung von Abschreibungen & Verlusten
- Automatische Preisgestaltung

#### Beratung & Nutzung Sprachmodelle



## KI in der Pharmazie



### Apotheke

#### Waren & Preismanagement

#### Beratung & Nutzung Sprachmodelle

- Erstellung einer Reiseapotheke
- Übersetzungen im Kundengespräch
- Chatbots für Kundenanfragen
- Generierung von Texten/Bilder für Social Media & Websites



### Adobe Firefly

Prompt: Menschliche Hand und Roboterhand formen ein Herz.  
Im Hintergrund sieht man eine Apotheke.



**Noch Fragen offen?**